

STICHTING
MATHEMATISCH CENTRUM
2e BOERHAAVESTRAAT 49
AMSTERDAM

AFDELING MATHEMATISCHE STATISTIEK

S 394

Over het toetsen van hoofdeffekten bij aanwezigheid
van interacties in de variantieanalyse

door

L. de Haan en T. de Vries



maart 1968

The Mathematical Centre at Amsterdam, founded the 11th of February, 1946, is a non-profit institution aiming at the promotion of pure mathematics and its applications, and is sponsored by the Netherlands Government through the Netherlands Organization for the Advancement of Pure Research (Z.W.O.) and the Central Organization for Applied Scientific Research in the Netherlands (T.N.O.), by the Municipality of Amsterdam and by several industries.

§0. Het probleem

Bij het Mathematisch Centrum is een algemeen variantieanalyse-programma in gebruik waarmee toetsen en schattingen kunnen worden verkregen; dit programma is gebaseerd op een parametrisering van de verschillende effecten zoals b.v. behandeld wordt in [1], hoofdstuk 1 en 2. Bij een praktijkgeval - met als parameters de hoofdeffekten en interacties onder de gebruikelijke (homogene) bijvoorwaarden - bleken de schatters voor de interacties niet aan de gestelde bijvoorwaarden te voldoen. De vraag was: hoe komt dit, wanneer is zoiets precies het geval en hoe is het op te vangen. Het zal blijken dat deze - gebruikelijke - parametrisering in sommige beperkte modellen niet een toegelaten parametrisering (in de zin van stelling (1.1)) is. Het hoofdresultaat staat vermeld in stelling (2.1); de formulering van die stelling maakt gebruik van definitie (2.1). In §1 wordt het speciale geval van een tweefaktormodel besproken.

§1. Het tweefaktormodel

We bekijken een tweefaktormodel uit de variantieanalyse. Het gebruikte model is

$$1.1. \quad y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + e_{ijk}$$

voor $i = 1, 2, \dots, I$; $j = 1, 2, \dots, J$; $k = 1, 2, \dots, K_{ij}$ ($K_{ij} > 0$ voor alle i en j ; er zijn dus geen lege cellen). De variabelen e_{ijk} worden onderling onafhankelijk verondersteld met verwachting nul en gelijke variantie σ^2 .

In dat geval is

$$1.2. \quad \eta_{ij} = E y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij}.$$

In vektornotatie kunnen we dit schrijven als

$$1.3. \quad \eta = X' \beta, \text{ waarbij } \eta' = (\eta_{11}, \eta_{12}, \dots, \eta_{1J}, \dots, \eta_{I1}, \dots, \eta_{IJ}) \text{ en} \\ \beta' = (\mu, \alpha_1, \dots, \alpha_I, \beta_1, \dots, \beta_J, \gamma_{11}, \gamma_{12}, \dots, \gamma_{IJ}).$$

In de matrix X' komen slechts nullen en enen voor. Men kan bij gegeven vektor η vele vectoren β vinden die voldoen aan (1.3). Om de gewenste één-één-duidigheid van de afbeelding te krijgen leggen we aan de vektor β lineaire restricties op. Hierbij maken we gebruik van de volgende stelling (zie [1] sec. (1.4)).

Stelling 1.1. Zij X' een $n \times p$ -matrix en H' een $t \times p$ -matrix. De afbeelding $\eta = X' \beta$. $0 = H' \beta$ beeldt de kern van H' dan en slechts dan één-één-duidig af op de kolommenruimte van X' als

- de rang van $G' = \begin{pmatrix} X' \\ H' \end{pmatrix}$ gelijk is aan p en
- de doorsnede van de rijenruimte van X' en de rijenruimte van H' de nulvektor is.

We kiezen nu de bijvoorwaarden:

$$\sum_i \alpha_i = \sum_j \beta_j = 0,$$

$$\sum_i \gamma_{ij} = 0 \quad \text{voor } j = 1, 2, \dots, J,$$

$$\sum_j \gamma_{ij} = 0 \quad \text{voor } i = 1, 2, \dots, I.$$

Nu levert de hiermee gedefiniëerde matrix H' een stelsel op dat aan a en b voldoet.

Het is duidelijk dat voor de kleinste-kwadraten-schatters van de parameters die aan de bijbehorende bijvoorwaarden voldoen, moet gelden (we nemen even gelijke aantallen, en wel K , waarnemingen per cel):

$$X\hat{\underline{y}} = XX'\hat{\underline{\beta}}$$

$$0 = H'\hat{\underline{\beta}}$$

waarin

$$\hat{\underline{y}}_{ij} = K^{-1} \sum_{k=1}^K y_{ijk} \quad \text{en} \quad \underline{\beta}' = (\hat{\underline{\mu}}, \hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_I, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_J, \gamma_{11}, \dots, \gamma_{IJ}).$$

Noemen we

$$G' = \begin{pmatrix} X' \\ H' \end{pmatrix}$$

dan geldt

$$GG'\hat{\underline{\beta}} = G\begin{pmatrix} \hat{\underline{y}} \\ 0 \end{pmatrix} = X\hat{\underline{y}}.$$

Uit a volgt dat GG' inverteerbaar is dus:

$$1.4. \quad \hat{\underline{\beta}} = (GG')^{-1}X\hat{\underline{y}} = (XX' + HH')^{-1}X\hat{\underline{y}}.$$

De komponent van de vektor $\hat{\underline{y}}$ die loodrecht staat op het beeld van de afbeelding (1.3) wordt door de afbeelding (1.4) op de nulvektor afgebeeld zodat (1.4) dus als een echte inverse afbeelding beschouwd kan worden. Deze schattingsmethode gebruikt men onder andere bij het toetsen van lineaire hypothesen, vooral met behulp van de computer.

We bekijken de hypothese $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_I = 0$ en wel zonder te voren te eisen dat de interacties (γ_{ij}) nul zijn. Dat dit niet alleen een theoretisch denkbare maar ook een praktisch voorkomende hypothese is, mag blijken uit het volgende voorbeeld.

De faktor A heeft 2 niveau's: het al of niet invoeren van de een of andere verkeersmaatregel (zebrapad, maximumsnelheid enz.) die in de verschillende seizoenen eventueel een verschillende invloed heeft op de gemeten grootte: de tijd nodig om per auto van een bepaald punt naar een ander te rijden. Faktor B zou dan b.v. 4 niveau's kunnen hebben, korresponderend met de 4 seizoenen. De hypothese die hier van belang is, is $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, ongeacht de vraag of er interacties zijn of niet.

Voor het toetsen van genoemde hypothese willen we de schattingen voor de parameters hebben in het model:

$$\eta_{ij} = \mu + \beta_j + \gamma_{ij} \quad \text{met:}$$

1.5.

$$\sum_j \beta_j = \sum_i \gamma_{ij} = \sum_j \gamma_{ij} = 0 \quad ;$$

of, in matrixvorm:

$$\eta = \tilde{X}'\beta$$

1.6.

$$0 = \tilde{H}'\beta.$$

Deze matrices \tilde{X}' en \tilde{H}' voldoen niet aan de voorwaarden van stelling (1.1). We zullen dit nagaan bij een voorbeeld, stel $I = 2$, $J = 3$; in dit geval wordt de matrix \tilde{X}' :

1.7.

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

en de matrix \tilde{H}' :

1.8.

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

We zien dat de matrix \tilde{X}' 6 onafhankelijke rijen heeft en de matrix H' 5. De rang van $\tilde{G}' = \begin{pmatrix} \tilde{X}' \\ \tilde{H}' \end{pmatrix}$ is hoogstens gelijk aan 10, het aantal kolommen; dus bestaat er een niet-nul-vektor die een element is van zowel de rijenruimte van \tilde{X}' als van de rijenruimte van \tilde{H}' . Dit is in tegenspraak met voorwaarde b van stelling (1.1).

(Tellen we de eerste drie rijen van \tilde{X}' bij elkaar op, trekken we daar van af de laatste drie rijen van \tilde{X}' , dan krijgen we het verschil van rij 2 en rij 3 van \tilde{H}' .)

Uit stelling (1.1) volgt dat de afbeelding (1.6) niet een afbeelding is van de kern van \tilde{H}' op de kolommenruimte van \tilde{X}' (= kolommenruimte van X') maar een afbeelding van de kern van \tilde{H}' op een echte deelruimte, zeg D , van de kolommenruimte van \tilde{X}' . Een echte inverse afbeelding (schatter) zou dus de komponent van \hat{y} die loodrecht staat op D , op de nulvektor moeten afbeelden. De afbeelding \ast)

$$1.9. \quad \hat{\beta} = (\tilde{X}\tilde{X}' + \tilde{H}\tilde{H}')^{-1}\tilde{X}'\hat{y}$$

beeldt echter alleen de komponent van \hat{y} , die loodrecht staat op de kolommenruimte van \tilde{X}' , af op de nulvektor en niet de komponent, loodrecht op D , binnen de kolommenruimte van \tilde{X}' . De schatters (1.9) zullen niet aan de overeenkomstige bijvoorwaarden voldoen, want de dimensie van het beeld van de afbeelding (1.9) is gelijk aan de dimensie van de rijenruimte van \tilde{X}' en we hebben gezien dat deze groter is dan de dimensie van de kern van \tilde{H}' . De schatters (1.9) zijn dus niet de gezocht schatters**).

Het is uiteraard mogelijk de gestelde hypothese te onderzoeken zonder gebruik te maken van de schattingen van de (overblijvende) parameters van het model ($[1]$, sec. 4.4 bij ongelijke aantallen waarnemingen per cel). Willen we echter gebruik maken van een rekenprogramma dat van die schattingen uitgaat dan kunnen we het volgende bedenken: een model

\ast) De rang van \tilde{G}' is gelijk aan het aantal componenten van $\hat{\beta}$ zodat de inverse van $\tilde{G}\tilde{G}'$ bestaat.

***) Men kan door uitwerking van het voorbeeld nagaan dat de schatters (1.9) niet alleen niet aan de bijvoorwaarden voldoen, maar bovendien geen kleinste kwadratenschatters zijn in het model m.a.w.

$\tilde{X}\tilde{X}'(\tilde{X}\tilde{X}' + \tilde{H}\tilde{H}')^{-1}\tilde{X} \neq \tilde{X}$, zodat het gebruik van (1.9) een onjuiste toetsingsgrootte zou opleveren.

verandert niet bij substitutie van enkele lineaire restricties van de matrix \tilde{H}' . De rijen van de matrix \tilde{H}' die verantwoordelijk zijn voor de afhankelijkheid van de matrix \tilde{X}' zijn (in ons voorbeeld 1.8) de tweede en derde. Substitueren we de daarmee korresponderende bijvoorwaarden $\sum_j \gamma_{ij} = 0$ voor $i = 1, 2$, b.v. door te stellen $\gamma_{13} = -\gamma_{11} - \gamma_{12}$ en $\gamma_{23} = -\gamma_{21} - \gamma_{22}$ dan zijn de rijen van de nieuwe matrix \tilde{X}'

$$1.10 \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

onafhankelijk van die van de nieuwe matrix \tilde{H}'

$$1.11 \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

De nieuwe getransponeerde parametervektor wordt dan

$(\mu, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{21}, \gamma_{22})$. De afbeelding

$$1.12 \quad \hat{\beta} = (\tilde{X}\tilde{X}' + \tilde{H}\tilde{H}')^{-1}\tilde{X}'\hat{y}$$

levert dan de kleinste-kwadratenschatters van de parameters die aan de bijvoorwaarden voldoen.

Bij berekening blijkt dat de afbeelding (1.9) als resultaat heeft

$$\begin{aligned} \mu &= \hat{y}_{..} \\ \beta_j &= \hat{y}_{.j} - \hat{y}_{..} \\ \gamma_{ij} &= \hat{y}_{ij} - \hat{y}_{.j} - \frac{3}{4}\hat{y}_{i.} + \frac{3}{4}\hat{y}_{..} \end{aligned}$$

voor $i = 1, 2, \dots, I$; $j = 1, 2, \dots, J$. Omdat in het model geldt $\eta_{i.} - \eta_{..} = 0$ voor $i = 1, 2, \dots, I$, zijn deze schattingen, die niet aan de bijbehorende bijvoorwaarden voldoen, wel zuiver.

Bij gelijke aantallen waarnemingen per cel is het niet nodig matrices te inverteren; de kleinste-kwadraten-schatters zijn in dat geval onmiddellijk op te schrijven. De bovenstaande redenering is echter zonder meer aan te passen voor het geval van ongelijke aantallen waarnemingen per cel (gesteld dat geen der cellen leeg is); zie hiervoor de opmerking aan het einde van §2.

2. Het algemene geval

Zij gegeven een $I_1 I_2 \dots I_n$ -dimensionale stochastische vektor $\underline{Y} = (Y_{11\dots 1}, Y_{11\dots 12}, Y_{11\dots I_n}, Y_{11\dots 121}, \dots, Y_{I_1\dots I_n})$, waarvan de componenten onderling onafhankelijk verdeeld zijn met gelijke variantie σ^2 . We noteren $E\underline{Y} = \eta$ en voeren een $(I_1+1)(I_2+1) \dots (I_n+1)$ -dimensionale vektor β in die we in verband met het volgende als volgt noteren

$$\beta = (\alpha^0, \alpha_1^1, \alpha_2^1, \dots, \alpha_{I_1}^1, \alpha_1^2, \dots, \alpha_{I_1}^2, \alpha_{11}^{12}, \alpha_{12}^{12}, \dots, \alpha_{I_1 I_2}^{12}, \alpha_{11}^{23}, \dots, \alpha_{I_1\dots I_n}^{12\dots n});$$

de componenten van β noemen we de parameters van het model. We geven de Euklidische ruimte waarin de vektor η ligt aan met A en die waarin β ligt met B .

Een lineaire deelruimte $U \subset B$ wordt gedefinieerd door de volgende lineaire restricties

$$\begin{aligned} 2.1. \quad & \sum_{i_1=1}^{I_1} \alpha_{i_1}^1 = \sum_{i_2=1}^{I_2} \alpha_{i_2}^2 = \dots = 0, \\ & \sum_{i_1=1}^{I_1} \alpha_{i_1 i_2}^{12} = \sum_{i_2=1}^{I_2} \alpha_{i_1 i_2}^{12} = \dots = 0, \dots, \\ & \sum_{i_1=1}^{I_1} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_n}^{12\dots n} = \sum_{i_2=1}^{I_2} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_n}^{12\dots n} = \dots = \sum_{i_n=1}^{I_n} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_n}^{12\dots n} = 0. \end{aligned}$$

We definiëren een lineaire afbeelding van U naar A als volgt

$$2.2. \quad \eta_{i_1 i_2 \dots i_n} = \alpha^0 + \alpha_{i_1}^1 + \alpha_{i_2}^2 + \dots + \alpha_{i_n}^n + \alpha_{i_1 i_2}^{12} + \dots + \alpha_{i_{n-1} i_n}^{n-1, n} + \dots + \alpha_{i_1 i_2 \dots i_n}^{12\dots n}$$

waarbij de index i_k de getallen $1, 2, 3, \dots, I_k$ doorloopt voor elke k . In matrixvorm schrijven we (2.2) resp. (2.1) als

$$2.3. \quad \eta = X' \beta \quad \text{en} \quad H' \beta = 0.$$

Zoals bekend is de afbeelding (2.2) éénéénduidig; de inverse afbeelding wordt in de bekende puntnotatie \ast):

$$2.4. \quad \alpha^0 = \eta_{00\dots 0}; \quad \alpha_{i_1}^1 = \eta_{i_1 00\dots 0} - \eta_{00\dots 0}, \text{ enzovoort.}$$

De verzameling parameters $\ast\ast$) $\{\alpha_{i_1 i_2 \dots i_r}^{k_1 k_2 \dots k_r}\}_{i_1 \dots i_r}$ noemen we het effekt $\alpha_{i_1 \dots i_r}^{k_1 \dots k_r}$ waarin de faktoren k_1, k_2, \dots, k_r optreden.

Definitie 2.1. We voeren in de verzameling der effecten een partiële ordening in: het effekt γ_1 gaat vooraf aan het effekt γ_2 (notatie $\gamma_2 \prec \gamma_1$) als alle in γ_1 optredende factoren ook in γ_2 optreden. Het effekt α^0 gaat aan alle andere effecten vooraf.

Voorbeeld: $\alpha^{136} \prec \alpha^{13} \prec \alpha^3$

Met gebruik van de matrix

$$G' = \begin{pmatrix} X' \\ H' \end{pmatrix}$$

schrijven we (2.3) als

$$G'\beta = \begin{pmatrix} \eta \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Dus

$$GG'\beta = G \begin{pmatrix} \eta \\ 0 \end{pmatrix} = X\eta.$$

Dit geeft, omdat $\text{rang } G' = (I_1+1)(I_2+1) \dots (I_n+1)$, de inverse transformatie:

$$\beta = (GG')^{-1}X\eta = (XX' + HH')^{-1}X\eta.$$

\ast) Wegens typografische moeilijkheden wordt hier een o-notatie gebruikt.

$\ast\ast$) $\alpha_{i_1 \dots i_r}^{k_1 \dots k_r}$ is een vereenvoudigde schrijfwijze voor $\alpha_{i_{k_1} i_{k_2} \dots i_{k_r}}^{k_1 \dots k_r}$

De kleinste-kwadratenschatters die aan de bijvoorwaarden voldoen zijn dus:

$$2.5. \quad \underline{\hat{\beta}} = (XX' + HH')^{-1}XY.$$

We vragen ons het volgende af: als bekend is - door hypothese of in het model - dat bepaalde effecten afwezig zijn (afwezigheid van $\alpha_{i_1 \dots i_r}^{k_1 \dots k_r}$ wil zeggen $\alpha_{i_1 \dots i_r}^{k_1 \dots k_r} = 0$ voor alle i_1, i_2, \dots, i_r), is dan deze methode van berekenen van de kleinste-kwadratenschatters (met behulp van de bij het model passende matrices X' en H') nog juist en - zo niet - hoe zijn die dan te berekenen?

Het zal blijken dat deze schattingsmethode dan en slechts dan juiste resultaten geeft als met elk ontbrekend effect γ ook alle effecten γ^ met $\gamma^* \prec \gamma$ ontbreken. Zijn er effecten γ en γ^* met $\gamma^* \prec \gamma$ waarbij γ^* aanwezig is en γ niet, dan levert substitutie van bijvoorwaarden van al die effecten γ^* nieuwe matrices X' en H' , die ingevuld in (2.5) wel de juiste schatters voor de parameters opleveren.*

We definiëren bij elk effect γ lineaire deelruimten $A_\gamma \subset A_\gamma^* \subset A$ op de volgende manier:

A_0^* is de ruimte opgespannen door de vektor

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

A_1^* is de ruimte opgespannen door de vektoren

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ \circ \\ \circ \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \circ \\ \circ \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \circ \\ \circ \\ \circ \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

enzovoort, bij elk effect de ruimte opgespannen door de overeenkomstige kolomvectoren van X' . Verder is $\ast)$

$$\begin{aligned}
 A_0 &= A_0^\ast \\
 A_1 &= A_1^\ast \ominus A_0 \\
 A_2 &= A_2^\ast \ominus A_1 \ominus A_0 = A_2^\ast \ominus A_0. \\
 &\text{enz.}
 \end{aligned}$$

Deze deelruimten zijn gedefinieerd onafhankelijk van het al of niet optreden van de effecten.

De lineaire deelruimten $A_0, A_1, A_2, \dots, A_{12..n}$ staan alle loodrecht op elkaar en spannen samen de kolommenruimte van X' op. Als alle effecten aanwezig zijn is dit de gehele ruimte A .

$\ast)$ $A \ominus B$ wil zeggen de verzameling vektoren uit A die loodrecht op alle vektoren van B staan.

$A \oplus B$ wil zeggen de verzameling vektoren die als sommen van vektoren uit A en B te schrijven zijn (we veronderstellen dat $A \perp B$).

We formuleren eerst enige hulpstellingen:

Hulpstelling 2.1. $\dim (A_{k_1 k_2 \dots k_r}^*) = I_{k_1} I_{k_2} \dots I_{k_r}$

$$\dim (A_{k_1 k_2 \dots k_r}^*) = (I_{k_1} - 1)(I_{k_2} - 1) \dots (I_{k_r} - 1)$$

Bewijs: $A_{k_1 k_2 \dots k_r}^*$ heeft $I_{k_1} I_{k_2} \dots I_{k_r}$ opspannende vektoren die onafhankelijk zijn. De tweede bewering volgt uit stelling 3 van de appendix.

Hulpstelling 2.2. $A_\gamma^* = A_\gamma + A_{\gamma_1} + A_{\gamma_2} + \dots + A_{\gamma_m}$, waarbij $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m$ alle effecten zijn die voorafgaan aan γ .

Bewijs: Zeg $\gamma = \alpha^{12\dots r}$, dan is

$$A_\gamma^* = A_{12\dots r}^* = \{ \eta = (\eta_{i_1 \dots i_n}) \mid i_1 = j_1, i_2 = j_2, \dots, i_r = j_r \Rightarrow \eta_{i_1 \dots i_n} = \eta_{j_1 \dots j_n} \}$$

(bijvoorbeeld: voor elke vektor $(\eta_{i_1 \dots i_n}) \in A_{12}^*$ geldt dat $\eta_{5411\dots 1}$ en $\eta_{5422\dots 2}$ gelijk zijn). Dus als $\gamma_1 \prec \gamma$ dan $A_{\gamma_1} \subset A_\gamma^* \subset A_\gamma^*$, dat wil zeggen

$$A_\gamma \oplus A_{\gamma_1} \oplus A_{\gamma_2} \oplus \dots \oplus A_{\gamma_m} \subset A_\gamma^*.$$

Verder geldt: $\dim (A_\gamma^*) = \dim (A_{12\dots r}^*) = I_1 I_2 \dots I_r =$

$$= \{(I_1 - 1) + 1\} \{(I_2 - 1) + 1\} \dots \{(I_r - 1) + 1\} = (I_1 - 1)(I_2 - 1) \dots (I_r - 1) =$$

$$= (I_1 - 1)(I_2 - 1) \dots (I_{r-1} - 1) + \dots + (I_2 - 1) \dots (I_r - 1) + \dots + I_1 + I_2 + \dots + I_r + 1 =$$

$$= \dim (A_\gamma) + \sum_m \dim (A_{\gamma_m}) \text{ dus } A_\gamma \oplus A_{\gamma_1} \oplus \dots \oplus A_{\gamma_m} = A_\gamma^*.$$

Noem de deelruimte opgespannen door de vektoren $\beta \in B$ waarvoor geldt dat alle componenten, behalve misschien $\{\alpha_{i_1, \dots, i_r}^{k_1, \dots, k_r}\}_{i_1, \dots, i_r}$, nul zijn

B_{k_1, \dots, k_r}^* . Dan geldt:

Hulpstelling 2.3. Als alle effecten aanwezig zijn wordt voor elk effect γ de deelruimte $B_\gamma \subset B$ door de afbeelding (2.3) afgebeeld op $A_\gamma \subset A$.

Gevolg. De afbeelding (2.3) is dus ook voor elk van deze deelruimten éénéénduidig.

Bewijs: Zeg weer $\gamma = \alpha^{12\dots r}$, dan geldt wegens hulpstelling (2.2):

$$\begin{aligned} A_\gamma &= A_{12\dots r} = \{ \eta = (\eta_{i_1\dots i_n}) \mid \eta \in A_{12\dots r}^* \text{ en } \eta_{i_1\dots i_{r-1}00\dots 0} = \\ &= \eta_{i_1\dots i_{r-2}0i_r0\dots 0} = \dots = \eta_{0i_2\dots i_r00\dots 0} = 0 \\ &\text{voor alle } i_1, i_2, \dots, i_r \}. \end{aligned}$$

Het beeld van een element $(\alpha_{i_1 i_2 \dots i_r}^{12\dots r})_{i_1\dots i_r}$ uit $B_{12\dots r}$ is

$\eta = (\eta_{i_1\dots i_n}) = (\alpha_{i_1\dots i_r}^{12\dots r})_{i_1\dots i_n}$. Men ziet dat dit een element van $A_{12\dots r}$ is. Omdat voor elk effect $\alpha^{k_1\dots k_r}$ geldt: beeld $(B_{k_1\dots k_r}) \subset A_{k_1\dots k_r}$ en omdat de afbeelding (2.3) éénéénduidig is, volgt het gestelde.

Nemen we als voorbeeld de X' -matrix (1.5) van het 2-faktormodel uit §1. De eerste kolom spant A_0 op, de tweede en derde kolom A_1^* , de vierde, vijfde en zesde kolom A_2^* en de overige kolommen A_{12}^* . Verder is $A = A_0 \oplus A_1 \oplus A_2 \oplus A_{12}$. De componenten van de verwachtingsvektor η schrijven we in de puntnotatie als volgt

$$\eta_{ij} = \eta_{..} + (\eta_{i.} - \eta_{..}) + (\eta_{.j} - \eta_{..}) + (\eta_{ij} - \eta_{i.} - \eta_{.j} + \eta_{..})$$

waarbij de vier termen korresponderen met de projekties op de deelruimten A_0 , A_1 , A_2 en A_{12} . Stel nu dat de interacties ontbreken, d.w.z. volgens hulpstelling (2.3) $\eta \in A \ominus A_{12}$, dan spannen de deelruimten A_0 , A_1 en A_2 de kolomruimte van de gereduceerde matrix X' op. Ontbreekt daarentegen b.v. de faktor a (korresponderend met de $\{\alpha_i\}$), maar niet de interacties, d.w.z. $\eta \in A \ominus A_1$, dan is blijkens (1.8)

de kolommenruimte van de gereduceerde matrix X' gelijk aan A dus groter dan de definitieruimte van η .

Laten we bij ontbreken van effecten de overeenkomstige kolommen van de matrices X' en H' weg, dan geldt de volgende

Stelling 2.1. Er zijn twee mogelijkheden:

1. Met elk ontbrekend effect, ontbreken ook alle effecten γ^* met $\gamma^* \prec \gamma$; in dit geval geldt: de overblijvende componenten van de vektor tot β zijn alle schatbaar in het model en de kleinste-kwadratenschatters die aan de bijvoorwaarden voldoen worden gegeven door (2.5).
2. Er zijn effecten γ en γ^* met $\gamma^* \prec \gamma$ waarbij γ^* aanwezig is en γ niet; in dit geval zijn de overblijvende componenten van de vektor β alle schatbaar maar de kleinste-kwadraten-schatters die aan de bijvoorwaarden voldoen worden niet gegeven door (2.5).

Bewijs: Welke effecten ook ontbreken, steeds bestaat een éénéénduidig verband tussen de vektor η en de aan bijvoorwaarden onderworpen getallen $\alpha^0, \alpha^1_{i_1}, \dots, \alpha^{1\ 2\ \dots\ n}_{i_1\ i_2\ \dots\ i_n}, \dots, \alpha^{1\ 2\ \dots\ n}_{I_1\ I_2\ \dots\ I_n}$ (waarbij de ontbrekende effecten zijn weggelaten) door middel van enerzijds de relaties (2.2) en anderzijds de relaties (2.4). De vektor η doorloopt hierbij niet de gehele ruimte A maar een lineaire deelruimte van A , gedefinieerd door *)
 $\alpha^{\gamma_1}_{i(\gamma_1)} = 0, \alpha^{\gamma_2}_{i(\gamma_2)} = 0, \dots, \alpha^{\gamma_m}_{i(\gamma_m)} = 0$ voor alle $i(\gamma_1), i(\gamma_2), \dots, i(\gamma_m)$
 ($\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m$ zijn de ontbrekende effecten), vertaald in beperkingen voor de η -vektor met behulp van de afbeelding

$$\beta = (XX' + HH')^{-1} X\eta,$$

d.w.z. $\eta \in A_d = A \ominus A_{\gamma_1} \ominus A_{\gamma_2} \ominus \dots \ominus A_{\gamma_m}$; dit volgt uit hulpstelling (2.3).

*) De uitdrukking $i(\gamma)$ stelt een vektor van indices behorend bij het effect γ voor.

We definiëren de matrix F als volgt: Fg is de projectie van de vektor g op A_d voor $g \in A$ en de matrix P als volgt: Pg is de projectie van g op de kolommenruimte van X' voor $g \in A$.

Bij elke $\eta \in A_d$ is er een $\beta \in B$ met $X'\beta = \eta$ en $H'\beta = 0$ dus $*$)

$$\beta = (XX' + HH')^{-1}X\eta$$

voor $\eta \in A_d$ dus

$$\beta = (XX' + HH')^{-1}X F\eta$$

is een afbeelding die vektoren $\eta \perp A_d$ op nul afbeeldt en vektoren $\eta \in A_d$ op vektoren β waarvoor (2.3) geldt $***$).

Steeds geldt: $A_d \subset$ kolommenruimte van X' . Welnu: de kolommenruimte van X' is de direkte som van A_0^* , A_1^* , ..., $A_{12..n}^*$, waaronder alleen de deelruimten van de optredende effecten voorkomen.

In geval 1 van de stelling geldt volgens hulpstelling (2.2):

A_d = kolommenruimte van X' ; voor de echte inverse afbeelding van (2.3) geldt dan

$$\beta = (XX' + HH')^{-1}XF\eta = (XX' + HH')^{-1}XP\eta = (XX' + HH')^{-1}X\eta;$$

ook voor de kleinste-kwadratenschatters die aan de bijvoorwaarden voldoen geldt:

$$\hat{\beta} = (XX' + HH')^{-1}F\underline{y} = (XX' + HH')^{-1}X\underline{y}.$$

In geval 2 van de stelling zijn de kleinste-kwadratenschatters van β die aan de bijvoorwaarden voldoen

$$\hat{\beta} = (XX' = HH')^{-1}X\underline{Fy}$$

en deze uitdrukking is niet voor alle \underline{y} gelijk aan

$*$) De inverse van de matrix $XX' + HH'$ bestaat want stel dat er een $\beta^* \neq 0$ is met $X'\beta^* = 0$ en $H'\beta^* = 0$ dan zou gelden $\dim A_d < \dim$ (kern H'); dus G' heeft volledige rang.

$***$) Een dergelijke afbeelding noemen we een echte inverse afbeelding van de afbeelding (2.3).

$$(XX' + HH')^{-1}X_Y$$

want: stel $\gamma^* \in \gamma_k$ voor een $k \leq m$ en $\gamma^* \in \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m\}$ dan geldt:

$A_{\gamma_k} \in$ kolommenruimte van X' ;

dus geldt niet:

$A_d =$ kolommenruimte van X'

dat wil zeggen

rijenruimte $(XX' + HH')^{-1}X'F \neq$ rijenruimte $(XX' + HH')^{-1}X$.

Hiermee is de stelling bewezen.

Een methode om in geval 2 uit de moeilijkheden te komen is de volgende: Stel dat $\alpha^{12\dots r}$ afwezig is. Substitueer (voorzover aanwezig)

$$\alpha_{i_1 i_2 \dots i_r}^{12\dots rs} = - \sum_{i_s \neq I_s} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_r i_s}^{12\dots rs} \quad \text{voor alle } s > r$$

$$\alpha_{i_1 i_2 \dots i_r i_s i_t}^{12\dots rst} = - \sum_{i_s \neq I_s} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_r i_s i_t}^{12\dots rst} \quad \text{voor alle } s \text{ en } t > r$$

$$\alpha_{i_1 i_2 \dots i_r i_s i_t}^{12\dots rst} = - \sum_{i_t \neq I_t} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_r i_s i_t}^{12\dots rst} \quad \text{voor alle } s \text{ en } t > r$$

enzovoort; doe dit voor alle effecten die ontbreken. De rijen van H' die de betreffende restricties geven zijn nu overbodig geworden: we laten ze weg. De resulterende matrices noemen we \tilde{X}' en \tilde{H}' . Het is gemakkelijk in te zien dat de kolommen van \tilde{X}' corresponderend met het effect $\alpha^{12\dots rs}$ loodrecht staan op $A_{12\dots r}$. Dit geldt ook voor alle andere effecten waaraan $\alpha^{12\dots r}$ voorafgaat. Dus $A_d =$ kolommenruimte \tilde{X}' ; verder blijft de éénéénduidige toevoeging bestaan zodat we in geval 1 van de stelling zijn komen te verkeren.

Een belangrijke toepassing is de volgende:

Bij de gebruikelijke situatie van meerdere waarnemingen per cel (geen lege cellen) definiëren we als in §1 een vektor \underline{y} van celgemiddelden en een diagonaalmatrix N van aantallen waarnemingen per cel. We gebruiken dan een vektor $\eta^* = M\eta$ in plaats van η waarbij M de diagonaalmatrix is met $MM = N$; in plaats van (2.3) komt dan de afbeelding $\eta^* = MX'\beta$ en $H'\beta = 0$. De matrix $\begin{pmatrix} MX' \\ H' \end{pmatrix}$ voldoet dan en slechts dan aan de voorwaarden a. en b. van de stelling genoemd aan het begin van §1 (zie [1] sec (1.4)) als de matrix $\begin{pmatrix} X' \\ H' \end{pmatrix}$ aan die voorwaarden voldoet. Dus voor de schattingsmethode

$$\hat{\underline{\beta}} = (XMMX' + HH')^{-1}XMM\underline{y} = (XNX' + HH')^{-1}XN\underline{y}$$

geldt de stelling (2.1).

§3. Appendix: dimensiestelling

Definitie 3.1. Bij vectoren $a \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^n$, $a^i = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ en $b^i = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ definiëren we de tensorproduktvektor $a * b$ als $(a * b)^i = (a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_n b_n)$.

Bij een lineaire deelruimte $U \subset \mathbb{R}^n$ en een lineaire deelruimte $V \subset \mathbb{R}^n$ definiëren we de tensorproduktruimte $U * V$ als $U * V = \{c \in \mathbb{R}^n \mid \exists u \in U, v \in V \text{ } c = u * v\}$. De operatie $*$ is associatief en commutatief.

Opmerking. Uitgaande van de vectoren $\eta = (\eta_{i_1 \dots i_n}) \in A$, ingevoerd in §2, definiëren we naast de deelruimten

$A_0, A_1, A_1^*, \dots, A_{12 \dots n}, A_{12 \dots n}^*$ bij elk effect γ (zeg $\gamma = \alpha^{12 \dots r}$) nog de volgende deelruimte van A :

$$D_\gamma = D_{12 \dots r} = \{ \eta = (\eta_{i_1 i_2 \dots i_n}) \mid i_{r+1} = j_{r+1}, i_{r+2} = j_{r+2}, \dots, i_n = j_n \Rightarrow \\ \Rightarrow \eta_{i_1 \dots i_n} = \eta_{j_1 \dots j_n} \}.$$

Opmerking. $A_\gamma \cap D_\gamma = A_0$.

Hulpstelling 3.1. Voor $a, a^0 \in A_\gamma$ en $d, d^0 \in D_\gamma$ geldt:

$$a * d \perp a^0 * d^0 \Leftrightarrow a \perp a^0 \text{ of } d \perp d^0 \text{ of beide.}$$

$$\text{Bewijs: } (a * d, a^0 * d^0) = \sum_{\substack{1 \leq i_1 \leq I_1 \\ \vdots \\ 1 \leq i_r \leq I_r \\ 1 \leq i_{r+1} \leq I_{r+1} \\ \vdots \\ 1 \leq i_n \leq I_n}} a_{i_1 i_2 \dots i_n} a_{i_1 i_2 \dots i_n}^0 d_{i_1 i_2 \dots i_n} d_{i_1 i_2 \dots i_n}^0 =$$

$$= \left(\sum_{\substack{1 \leq i_1 \leq I_1 \\ \vdots \\ 1 \leq i_r \leq I_r}} a_{i_1 i_2 \dots i_n} a_{i_1 i_2 \dots i_n}^0 \right) \left(\sum_{\substack{1 \leq i_{r+1} \leq I_{r+1} \\ \vdots \\ 1 \leq i_n \leq I_n}} d_{i_1 \dots i_n} d_{i_1 \dots i_n}^0 \right)$$

$$= (a, a^0) \cdot (d, d^0).$$

Hulpstelling 3.2. Voor $U \subset A_\gamma$, $\dim(U) = q$ en $V \subset D_\gamma$, $\dim(V) = s$ geldt:

$$\dim(U * V) = (\dim U) \cdot (\dim V).$$

Bewijs: Laten u_1, u_2, \dots, u_q orthogonale opspannende vectoren van U zijn en v_1, v_2, \dots, v_s orthogonale opspannende vectoren van V , dan spant het stelsel orthogonale vectoren $(u_i * v_j)_{i=1}^q_{j=1}^s$ de ruimte $U * V$ op.

Gevolg. Men ziet langs rekursieve weg in dat $\dim(A_1 * A_2 * \dots * A_r) = (\dim A_1) \cdot (\dim A_2) \dots (\dim A_r) =$

$$= \prod_{k=1}^r (I_k - 1).$$

Hulpstelling 3.3.

$$A = A_0 \oplus A_1 \oplus \dots \oplus A_n \oplus A_1 * A_2 \oplus A_1 * A_3 \oplus \dots \oplus A_{n-1} * A_n \oplus \dots \oplus A_1 * A_2 * \dots * A_n.$$

Bewijs: Elke deelruimte uit het rechterlid staat loodrecht op elke andere deelruimte uit dit lid; dit volgt uit hulpstelling (3.1): bijvoorbeeld $A_1 = A_1 * A_0 \perp A_1 * A_2$ omdat $A_0 \subset D_2$. Verder geldt dat $\dim(\text{rechterlid}) = \dim(A_0) + \dots + \dim(A_1 * \dots * A_n) =$

$$= \sum_{k=1}^n I_k = \dim(A).$$

Stelling 3.4. $A_{k_1, \dots, k_r} = \sum_{i=1}^r * A_{k_i}.$

Bewijs: Uit de definitie van A_{k_1, \dots, k_r} en uit de definitie van de produktvektorruimte blijkt direct:

$$3.9. \quad A = A_{k_1, \dots, k_r} \supset \sum_{i=1}^r * A_{k_i}.$$

Stel nu: \exists ruimte $C \subset \mathbb{R}^{I_1 \dots I_n}$: $A_{k_1 \dots k_r} = \prod_i A_{k_i} \oplus C$.

Dus $C \subset A_\gamma$. Stel $c \in C$, dan geldt $c \neq \prod_i A_{k_i}$.

Er moet dus gelden, volgens (3.7): $\exists \gamma' \neq \gamma$, $\gamma' = m_1, \dots, m_s$:

$c \in \prod_{i=1}^s A_{m_i}$, dus volgens (3.9) $c \in A_{\gamma'}$. Maar $c \in A_{\gamma, \gamma \neq \gamma'}$, dus

$A \subset \mathbb{R}^{I_1 \dots I_n}$, dus $A_\gamma = \prod_i A_{k_i}$.

Gevolg. $\dim (R_{k_1 \dots k_r}) = \prod_{i=1}^r (I_{k_i} - 1)$.

Literatuur: 1. H. Scheffé (1959): The Analysis of Variance;
Wiley, New York.

